

УДК 536.46

МОДЕЛИРОВАНИЕ КОМБИНИРОВАННОГО ТЕПЛОПЕРЕНОСА В МНОГОКОМПОНЕНТОЙ ГЕТЕРОГЕННОЙ СРЕДЕ НА ОСНОВЕ СТОХАСТИЧЕСКИХ ПОДХОДОВ

П. С. Гринчук, О. С. Рабинович, Е. Г. Мосолова

*Лаборатория радиационно-конвективного теплообмена, Институт тепло- и массообмена
Национальной Академии Наук Беларуси, Минск, Беларусь*

Гетерогенные материалы и среды уже давно вызывают к себе повышенный интерес благодаря ряду замечательных физико-механических свойств. В большинстве практических применений таких материалов важную роль играют процессы переноса, в частности переноса тепла. Микроструктура гетерогенных материалов принципиально имеет стохастическую природу, что является основной проблемой при описании процессов переноса в них. В данной работе кратко рассмотрены различные подходы к моделированию процессов теплопереноса в гетерогенных средах, использующие элементы статистического анализа и теории вероятностей, а также предложен новый подход для описания данных процессов, в котором явным образом учитывается микроструктура гетерогенной среды.

Основную массу работ, посвященных теплопереносу в гетерогенных средах со случайной структурой, можно условно разделить на две части: использующие стохастические дифференциальные уравнения либо методологию случайных блужданий.

Прежде всего, мы хотели бы отметить общий подход к проблемам переноса, использующий стохастические дифференциальные уравнения [1-5]. Суть подхода состоит в том, что в детерминированном уравнении переноса коэффициенты переноса рассматриваются как случайные величины, вследствие чего в этих уравнениях возникают аддитивные флуктуирующие функции (шумы). Природа флуктуаций в каждом случае различна. Далее делаются определенные предположения о статистических характеристиках шума (задается явный вид корреляционной функции) и на основе известных преобразований из теории стохастических дифференциальных уравнений переходят к уравнению типа Фоккера-Планка для функции плотности вероятности макроскопической величины, описывающей процесс переноса (например, для концентрации). Этот подход использовался в большой серии работ М.В. Третьякова и С.П. Федотова, посвященных различным аспектам проблемы горения и сопутствующего тепломассообмена. Интересно, что учет наличия шума позволил предсказать существование качественно новых режимов горения. Дальнейший прогресс в этой области, на наш взгляд, может быть достигнут с использованием техники вейвлет-преобразований и мультифрактального формализма [6,7].

Применение методов случайных блужданий для описания процессов тепло- и массообмена началось с первых шагов компьютерных вычислений как таковых. Исторически первым был метод Монте-Карло, который называется еще методом исхода или методом случайных блужданий с фиксированным шагом (exodus method, fixed random walk method) [8-11]. Этот метод эффективно работает при нахождении стационарного температурного поля в области со сложной геометрией. Для гетерогенной среды температурное поле может быть описано следующим уравнением:

$$\sum_{p=1}^d \frac{\partial \sigma(\mathbf{x})}{\partial x_p} \frac{\partial T(\mathbf{x})}{\partial x_p} + \sigma(\mathbf{x}) \Delta T(\mathbf{x}) = -g(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in D. \quad (1)$$

Тогда рассматривая конечно-разностную аппроксимацию данного уравнения на квадратной сетке с шагом a

$$\frac{T_{i+1,j} - 2T_{i,j} + T_{i-1,j}}{a^2} + \frac{T_{i,j+1} - 2T_{i,j} + T_{i,j-1}}{a^2} = -g_{i,j}. \quad (2)$$

Для температуры в отдельном узле можем записать следующее выражение, являющееся базисом метода:

$$T_{i,j} = \frac{1}{4}(T_{i+1,j} + T_{i-1,j} + T_{i,j+1} + T_{i,j-1}) + \frac{a^2}{4} g_{i,j}. \quad (3)$$

Предположим далее, что в каждом узле сетки есть броуновские частицы, которые с одинаковой вероятностью могут двигаться во всех направлениях сетки. Рассмотрим n_s частиц, начинающих свое движение в точке \mathbf{x} . Частица k проходит через узлы $\{(x_p^{(k)}, y_p^{(k)})\}$, $p = 1, 2, \dots, m_k$, конечно-разностной сетки и покидает область D в $\{(x_{m_k}^{(k)}, y_{m_k}^{(k)})\} \in \partial D$. Значение $T(\bar{x})$ может быть аппроксимировано выражением:

$$\hat{T}(\mathbf{x}) = \frac{1}{n_s} \sum_{k=1}^{n_s} \left[T_b(x_{m_k}^{(k)}, y_{m_k}^{(k)}) + \frac{a^2}{4} \sum_{p=1}^{m_k} g(x_p^{(k)}, y_p^{(k)}) \right]. \quad (4)$$

Если $g = 0$, последний член уравнения (4) исчезает. Таким образом, выражение для \hat{T} будет являться решением уравнения Лапласа.

Существует модификация данного метода, называемая случайными блужданиями с плавающим шагом [12], когда броуновские частицы движутся не по узлам решетки, а по окружностям. В стартовой точке строится окружность, вписанная в исследуемую область, с максимально возможным радиусом. Следующая точка (направление шага) на окружности выбирается случайно. Далее в новой точке строится вписанная в область окружность и т.д. Сходимость и точность данного метода немного лучше, чем у метода с фиксированным шагом. Описанные методы решения уравнения теплопроводности являются одношаговыми.

Существует многошаговая модификация метода (multiple step random walk [13]), когда вероятность достижения точки на расстоянии нескольких шагов вычисляется аналитически и хранится в компьютере. Частица может как перемещаться по ближайшим соседним точкам, так и перепрыгивать через несколько точек. Численные результаты показывают хорошее соответствие с конечно-разностными решениями, при этом скорость вычислений для предложенного метода выше, чем у метода случайных блужданий с фиксированным шагом и с плавающим шагом [13].

Отметим очень перспективный и интересный метод решения уравнения теплопроводности, основанный на стохастическом дифференциальном уравнении для броуновского движения [12]. Предложенный метод имеет несколько отличительных черт. Он не требует разбиения области определения дифференциального уравнения, может быть применен для области любой размерности и геометрии, работает для

граничных условий, как Дирихле, так и Неймана и дает простые результаты для стационарного и нестационарного уравнения теплопроводности.

В одной из недавних работ в этой области предложен метод непрерывных во времени случайных блужданий [14] для описания теплопереноса именно в гетерогенной среде. Этот метод не требует дискретизации по времени, применим для описания нестационарного теплопереноса. Однако недостаток метода на наш взгляд заключен в том, что описание микроструктура среды требует введения модельной функции.

Описание радиационного теплопереноса с помощью метода Монте-Карло требует отдельного рассмотрения, выходящего за рамки данной работы. Отметим только, что нам не известны работы, в которых бы радиационный перенос в гетерогенных средах рассчитывался бы с помощью метода Монте-Карло и одновременно учитывал бы геометрические свойства микроструктуры. Существует ряд задач, например фильтрационное горение или самораспространяющийся высокотемпературный синтез, где учет радиационного теплопереноса является принципиальным.

Общий недостаток всех перечисленных методов: они не учитывают явно структуру гетерогенной среды, не позволяют одновременно описывать все механизмы теплопереноса. Метод, предложенный в данной работе, частично решает данные проблемы и позволяет моделировать одновременно радиационный и кондуктивный теплоперенос в гетерогенной среде с учетом ее микроструктуры.

Метод генерации гетерогенной структуры. Наиболее перспективным для генерации плотно упакованных гетерогенных структур (ГС) является метод, предложенный в работе [15]. Этот метод основан на использовании подхода молекулярной динамики. Рассмотрим его на примере двумерной системы. На двумерную область заданного размера *случайным* образом набрасываются диски с заданным распределением по размерам (т.е. с распределением по радиусам). Задача состоит в том, чтобы расположить данные диски внутри указанной области таким образом, чтобы они не пересекались друг с другом. Пересечения должны отсутствовать, поскольку эти диски моделируют твердые частицы. После начального случайного «разбрасывания» многие диски перекрываются друг с другом. Далее предполагается, что если имеет место пересечение дисков, то между ними действует постоянная по величине сила отталкивания F_{ij} , которая становится равной нулю при отсутствии пересечений. Эволюция такой системы, включающей большое число дисков, может быть описана методами молекулярной динамики. Однако при больших степенях заполнения пространства диски будут долго релаксировать к состоянию равновесия, в котором отсутствуют пересечения. Чтобы избежать этого и ускорить сходимость алгоритма дополнительно предполагается, что на все частицы действует вязкая сила, равная $-\mu\mathbf{V}$. Здесь \mathbf{V} – это вектор скорости частицы, μ - вязкость среды. Тогда динамика такой системы дисков описывается следующей системой уравнений:

$$m_i \frac{d^2 x_i}{dt^2} = \sum_{i \neq j} F_{ij} - \mu V_i. \quad (5)$$

Нас интересует конечное, стационарное состояние системы, в котором инерционные силы малы. Полагая, что инерционные силы малы по сравнению с вязкими, уравнения динамики системы можно существенно упростить и свести их к виду:

$$\frac{d\mathbf{x}_i}{dt} = \sum_{i \neq j} \frac{\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j}{|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|} \Delta_{ij} \quad \Delta_{ij} = \begin{cases} 1, & |\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j| < r_i + r_j; \\ 0, & |\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j| \geq r_i + r_j. \end{cases} \quad (6)$$

Численное решение этой простой системы уравнений позволяет очень эффективно находить распределение дисков по двумерной области, которое и служит моделью структуры ГС. Достоинством этого метода является его относительно быстрая сходимость, а также возможность использования простейших расчетных схем первого порядка при численном решении системы уравнений, описывающих динамику системы дисков. Последнее обстоятельство также ускоряет сходимость метода. Следует отметить, что для монодисперсной системы дисков при больших степенях заполнения пространства данный алгоритм позволяет автоматически генерировать регулярные или почти регулярные структуры. Отметим, что из известных нам алгоритмов данный алгоритм является наиболее быстрым для гетерогенных систем с высокой степенью заполнения пространства.

Метод описания процессов теплопереноса. Для построения математической модели, необходимой для выполнения моделирования процессов переноса в гетерогенных средах, рассмотрим модельный фрагмент гетерогенной среды (рисунок 1). Предполагается, что данная среда состоит из твердых частиц (структурных элементов) и порового пространства.

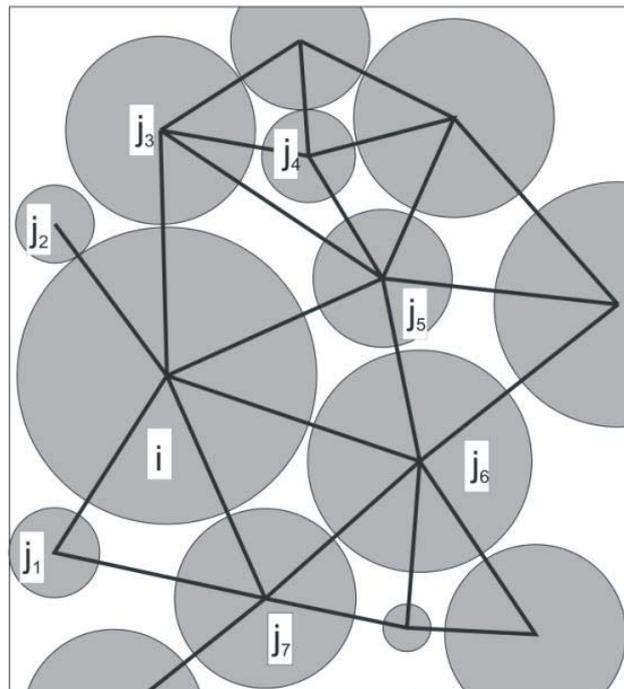


Рисунок 1. Иллюстрация проблемы описания комбинированного теплопереноса в гетерогенной среде. Комментарии в тексте.

Далее введем в рассмотрение ансамбль броуновских частиц (БЧ), носителей энергии, и процесс их случайных блужданий по всем структурным элементам гетерогенной среды. Все БЧ несут на себе равные порции энергии E_0 . В данной работе все структурные элементы среды рассматриваются как *изотермические*. Температура каждого структурного элемента пропорциональна числу БЧ, находящихся в данный момент на элементе:

$$T_i(t) = E_0 n_i / (V_i \rho c_p) = \omega_i n_i. \quad (7)$$

Здесь V , ρ , c_p - объем (м^3), плотность ($\text{кг}/\text{м}^3$) и теплоемкость ($\text{Дж}/(\text{кг К})$) структурного элемента.

Случайные блуждания БЧ, носителей энергии, подчиняются определенным вероятностным законам. Ниже мы покажем, что используя закон сохранения энергии, можно получить такие выражения для вероятностей перескоков БЧ между структурными элементами, что процесс случайных блужданий будет с определенной точностью описывать процесс теплопереноса по гетерогенной системе.

Если погрешность, с которой мы хотим описывать температурное поле, составляет ΔT , то среднее число БЧ на одном структурном элементе среды и его характерная температура T_* должны быть связаны соотношением: $\Delta T / T_* \approx 1 / \sqrt{\langle n_i \rangle}$ откуда для среднего числа БЧ на одном структурном элементе имеем выражение:

$$\langle n_i \rangle \approx (T_* / \Delta T)^2. \quad (8)$$

Для $\Delta T = 3 \text{ К}$ и $T_* = 300 \text{ К}$ имеем $\langle n_i \rangle \approx 10^4$. Для характерной энергии E_0 одной БЧ будет тогда справедливо следующее соотношение:

$$E_0 = V \rho c_p \Delta T \left(\frac{\Delta T}{T_*} \right). \quad (9)$$

Для структурной частицы диаметром 1 мм, плотностью 3000 $\text{кг}/\text{м}^3$ и теплоемкостью 800 $\text{Дж}/(\text{кг К})$ имеем характерную энергию БЧ: $E_0 \approx 3.7 \cdot 10^{-5} \text{ Дж}$.

Запишем уравнение энергии для произвольного изотермического структурного элемента гетерогенной среды.

$$V_i \rho c_p \frac{dT_i(t)}{dt} = \sum_j q_{ji} - \sum_j q_{ij} + q_{h,i} V_i. \quad (10)$$

Здесь суммирование ведется по всем соседям элемента, с которыми он обменивается энергией (рисунок 1); q_{ji} - это тепловой поток (Вт), который падает с соседнего j -го элемента на данный; q_{ij} - тепловой поток, падающий с рассматриваемого i -го элемента на соседний j -й; $q_{h,i}$ - плотность источника тепловыделения на i -ом элементе ($\text{Вт}/\text{м}^3$). Потоки q_{ij} связаны с кондуктивным и радиационным теплопереносом между соседними элементами. Для их описания в данной работе будут использованы следующие выражения:

$$q_{ij}^{(cd)} = S_{ij} \lambda_{ij} T_i / (r_i + r_j) \text{ (кондуктивный)}, \quad (11)$$

$$q_{ij}^{(cv)} = S_{ij} (\alpha_{ij} T_i) \text{ (конвективный)}, \quad (12)$$

$$q_{ij}^{(rd)} = g_{ij} (\varepsilon_i \sigma_0 T_i^4) \text{ (радиационный)}, \quad (13)$$

$$S_{ij} = 4\pi k_s r_i r_j, \quad (14)$$

$$\lambda_{ij} = \lambda_i \lambda_j (r_i + r_j) / (\lambda_j r_i + \lambda_i r_j). \quad (15)$$

Здесь S_{ij} – площадь контакта частиц, м² ($S_{ij} = S_{ji}$); k_s – коэффициент пропорциональности, который зависит от внешних условий и характеристик среды (шероховатость поверхности, степень механического сжатия и т.д.), и имеет смысл отношения площади контакта к общей площади поверхности частиц; r_i – радиус или характерный размер i -го структурного элемента, м; λ_i – теплопроводность частицы, Вт/(м К); λ_{ij} – эффективная теплопроводность двух контактирующих изотермических частиц; α_{ij} – коэффициент теплообмена частиц, Вт/(м²·К); ε_i – степень черноты поверхности элементов; g_{ij} – угловые коэффициенты для пары частиц, рассчитанные с учетом их локального окружения. Отметим, что для радиационного теплопереноса при численной реализации модели рассматривалось не только ближайшее окружение частиц, но и все структурные элементы, которые хотя бы частично находились в поле видимости с поверхности частицы.

Уравнение (10) является детерминированным, и его в принципе можно решать детерминированным численным методом. Однако при расчете радиационного теплопереноса необходимость рассмотрения отражения и переизлучения теплового излучения на каждом временном шаге вычислений делает детерминистические методы расчета чрезвычайно громоздкими. С другой стороны, сам процесс поглощения небольших порций лучистой энергии имеет стохастический характер. В дальнейшем предполагается дополнительно рассмотреть влияние флуктуации различных физических параметров гетерогенной системы (коэффициентов теплообмена, источников тепловыделения, площади контакта и т.д.) на характеристики процессов переноса. Поэтому авторами был сделан выбор в пользу изначального построения и развития алгоритмов стохастического метода случайных блужданий для описания стохастических по своей природе процессов переноса в гетерогенных средах.

На основе уравнения (10) мы можем оценить характерное время теплообмена частиц. Оно равно $\tau_h \sim r_p^2 / (ak_s)$. В то же время характерное время прогрева частиц определяется как $\tau_p \sim r_p^2 / a$. Изотермическое приближение применимо, если $\tau_h \gg \tau_p$. Отсюда мы получаем главное условие применимости нашей модели: $k_s \ll 1$. Для внутренних источников тепла можно получить аналогичную оценку для характерного времени генерации тепла в частицах: $\tau_q \sim \rho c_p \tilde{T} / \tilde{q}_h$, где \tilde{T} – характерная температура, а \tilde{q}_h – средняя плотность генерации тепла. Тогда из условия $\tau_q \gg \tau_p$ получаем второе условие применимости модели: $\tilde{q}_h \ll \lambda_p \tilde{T} / r_p^2$. Так, например, для случая, когда идет процесс горения частицы (твердофазная реакция в СВС) величину \tilde{q}_h можно оценить как $\tilde{q}_h \approx Q\rho / \tau_c$, где Q – тепловой эффект реакции (Дж/кг), τ_c – время сгорания частицы. В этой проблеме предлагаемая нами модель будет применима, если время сгорания частицы будет удовлетворять условию: $\tau_c \gg Q\rho r_p^2 / (\lambda_p \tilde{T})$. Для смеси NiAl ($Q \approx 2.3$ МДж/кг, $\lambda_p = 130$ Вт/(м К), $\rho = 6450$ кг/м³) получим оценку: для частиц диаметром 100 мкм – $\tau_c \gg 10^{-3}$ сек, а для 10 мкм – $\tau_c \gg 10^{-5}$ сек.

Выражение (10) с учетом (11)-(15) может быть записано следующим образом:

$$V_i \rho_i c_{p,i} \frac{dT_i(t)}{dt} = \sum_j \left(S_{ij} T_j \left[\frac{\lambda_{ij}}{r_i + r_j} + \alpha_{ji} \right] + g_{ji} \varepsilon_j \sigma_0 T_j^4 \right) - \sum_j \left(S_{ij} T_i \left[\frac{\lambda_i}{r_i + r_j} + \alpha_{ij} \right] + g_{ij} \varepsilon_i \sigma_0 T_i^4 \right) + Q_i \quad (16)$$

$$\omega_i \frac{dn_i(t)}{dt} = \sum_j \left(\frac{S_{ij} \omega_j}{V_i \rho_i c_{p,i}} \left[\frac{\lambda_j}{r_i + r_j} + \alpha_{ji} \right] n_j + \frac{g_{ji} \varepsilon_j \sigma_0 \omega_j^4}{V_i \rho_i c_{p,i}} n_j^4 \right) - \sum_j \left(\frac{S_{ij} \omega_i}{V_i \rho_i c_{p,i}} \left[\frac{\lambda_i}{r_i + r_j} + \alpha_{ij} \right] n_i + \frac{g_{ij} \varepsilon_i \sigma_0 \omega_i^4}{V_i \rho_i c_{p,i}} n_i^4 \right) + \frac{Q_i}{V_i \rho_i c_{p,i}} \quad (17)$$

$$n_i(t + \Delta t) = \sum_j \left(\frac{S_{ij} \omega_j}{V_i \rho_i c_{p,i} \omega_i} \left[\frac{\lambda_j}{r_i + r_j} + \alpha_{ji} \right] n_j + \frac{g_{ji} \varepsilon_j \sigma_0 \omega_j^3 \omega_j}{V_i \rho_i c_{p,i} \omega_i} n_j^4 \right) \Delta t + n_i \left\{ 1 - \sum_j \left(\frac{S_{ij} \omega_i}{V_i \rho_i c_{p,i}} \left[\frac{\lambda_i}{r_i + r_j} + \alpha_{ij} \right] + \frac{g_{ij} \varepsilon_i \sigma_0 \omega_i^3}{V_i \rho_i c_{p,i}} n_i^3 \right) \Delta t \right\} + \frac{Q_i}{V_i \rho_i c_{p,i} \omega_i} \Delta t \quad (18)$$

$$n_i(t + \Delta t) = \sum_j \beta_j^{(+)} n_j \Delta t + n_i \left\{ 1 - \sum_k \beta_k^{(-)} \Delta t \right\} + \frac{Q_i}{V_i \rho_i c_{p,i} \omega_i} \Delta t \quad (19)$$

$$\beta_j^{(+)} = \frac{S_{ij} \omega_j}{V_i \rho_i c_{p,i} \omega_i} \left[\frac{\lambda_j}{r_i + r_j} + \alpha_{ji} \right] + \frac{g_{ji} \varepsilon_j \sigma_0 \omega_j^3 \omega_j}{V_i \rho_i c_{p,i} \omega_i} n_j^3 \quad (20)$$

$$\beta_k^{(-)} = \frac{S_{ik}}{V_i \rho_i c_{p,i}} \left[\frac{\lambda_i}{r_i + r_j} + \alpha_{ik} \right] + \frac{g_{ik} \varepsilon_i \sigma_0 \omega_i^3 n_i^3}{V_i \rho_i c_{p,i}} \quad (21)$$

Уравнение (19) может быть переписано следующим образом:

$$n_i(t + \Delta t) = \sum_j \beta_j^{(+)} n_j \Delta t + \phi_i \Delta t + C_i [n_i p_0 - n_i p_-], \quad (22)$$

где $C_i = 1 + \Delta t \sum_k \beta_k^{(-)}$ – нормировочная константа; $\phi_i = \frac{q_{h,i}}{\rho_i c_{p,i} \omega_i} = \frac{q_{h,i} V_i}{E_0}$. Для любой

частицы системы выполняется соотношение $p_0 + p_- = 1$. Тогда величины p_0 и p_- могут быть интерпретированы в вероятностном смысле. Так, $p_0 = 1/C$ – это вероятность для БЧ остаться на структурном элементе в течение промежутка времени Δt ($p_0 \rightarrow 1$ при $\Delta t \rightarrow 0$); $p_- = \sum_k p_-^{(k)} = \sum_k \beta_k^{(-)} \Delta t / C$ – это вероятность для БЧ перескочить на любую соседнюю частицу за время Δt .

С точки зрения численных алгоритмов удобно разделить вероятности перескока БЧ с i -го структурного элемента на k -й, связанные с кондуктивными и радиационными потоками, поскольку соответствующие группы частиц в общем случае отличаются друг от друга.

$$p_-^{(k)} = p_-^{(\text{cd})} + p_-^{(\text{rd})} = (\beta_k^{(-)(\text{cd})} \Delta t / C_i) + (\beta_k^{(-)(\text{rd})} \Delta t / C_i)$$

Еще раз отметим, что рассматриваемая модель предполагает изотермичность отдельных структурных элементов системы. Поэтому временной шаг при численном расчете поля температур по порядку величины должен совпадать с характерным временем прогрева самой маленькой частицы системы. Проблема корректного выбора временного шага особенно актуальна для полидисперсной системы с большим разбросом размеров структурных элементов.

Метод описания радиационного теплопереноса в гетерогенной среде. Хорошо известно [17], что даже в оптически пассивной среде угловые коэффициенты не позволяют описать процесс радиационного теплопереноса между двумя телами, поскольку их непосредственное использование не позволяет учесть многократного переизлучения и рассеяния радиационных потоков. Эти эффекты возможно учесть только при совместном решении системы алгебраических уравнений для потоков теплового излучения, число которых равно числу поверхностей в системе. На основе решения данной системы получают так называемые разрешающие угловые коэффициенты, которые и описывают процесс радиационного теплопереноса в системе. Причем, даже если угловые коэффициенты для невогнутой поверхности для теплового потока на самую себя равны нулю, то в общем случае соответствующие разрешающие угловые коэффициенты не равны нулю – тепловое излучение, многократно переотразившись от соседних поверхностей, попадает обратно на поверхность, с которой оно «стартовало». Понятно, что для гетерогенной системы, состоящей из тысяч частиц, решение соответствующего числа алгебраических уравнений является громоздким и малопродуктивным подходом. Нам представляется, что именно в этом случае случайные блуждания ансамбля броуновских частиц позволяют корректно и наглядно описать радиационный теплоперенос в гетерогенной системе, когда для всех частиц известны парные угловые коэффициенты.

Вычисление угловых коэффициентов в гетерогенной среде. В предлагаемой модели основной характеристикой радиационного теплопереноса в гетерогенной среде являются угловые коэффициенты. Фактически пространственные характеристики радиационного теплопереноса в гетерогенной среде заключены в наборе угловых коэффициентов для всевозможных пар частиц, образующих данную среду. Остановимся подробнее на проблеме вычисления угловых коэффициентов для гетерогенной среды.

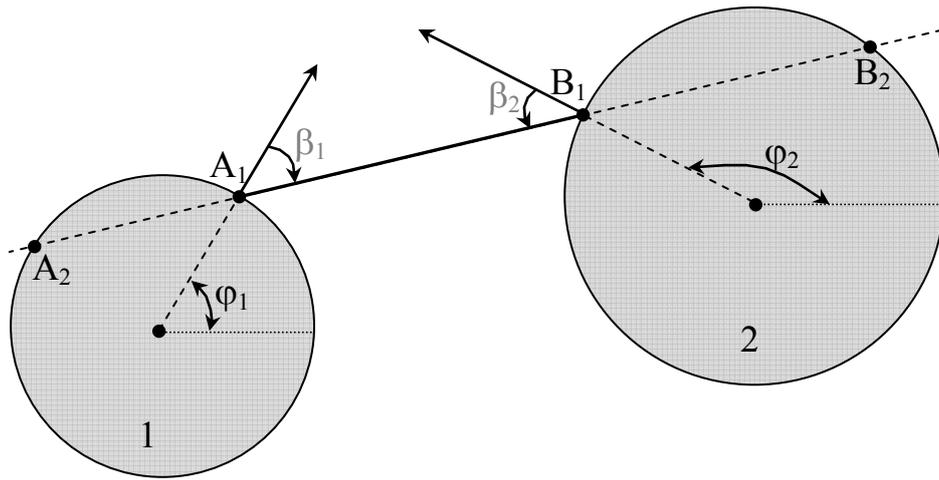


Рисунок 2. К проблеме вычисления угловых коэффициентов для двух произвольных сферических частиц.

Угловые коэффициенты для двух поверхностей произвольной формы определяются следующим выражением (для трехмерного случая) [17, 18].

$$\psi_{12} = \frac{1}{S_1} \iint_{S_2} \frac{\cos \beta_1 \cos \beta_2}{\pi r^2} dS_1 dS_2 \quad (23)$$

В данной работе рассматривается двумерное приближение. Для двумерного случая выражение для угловых коэффициентов для пары частиц будет выглядеть следующим образом.

$$\psi_{12} = \frac{1}{l_1} \int_{l_2} \int_{l_1} \frac{\cos \beta_1 \cos \beta_2}{\pi r} dl_1 dl_2 \quad (24)$$

Таким образом, интегрирование выполняется не по поверхности, а по периметру окружностей. Фактически, интегрирование выполняется по углам φ_1, φ_2 . С точки зрения численной реализации данного интегрирования удобно рассмотреть следующую схему. При интегрировании по углам будут встречаться такие комбинации в расположении точек A_1 и B_1 , при которых соответствующие элементарные площадки не будут находиться в зоне прямой видимости, а будут экранироваться фрагментами окружности. Пусть $y = ax + b$ – уравнение прямой, соединяющей две точки на поверхности окружностей 1 и 2. Тогда точки пересечения данных окружностей с указанной прямой определяются из решения простой системы уравнений

$$\begin{cases} y = ax + b, \\ (x - x_{10})^2 + (y - y_{10})^2 = R_1^2; \end{cases} \quad \begin{cases} y = ax + b, \\ (x - x_{20})^2 + (y - y_{20})^2 = R_2^2. \end{cases} \quad (25)$$

Когда две точки, через которые проведена прямая, заведомо принадлежат двум окружностям, то возможны 3 варианта для решения системы (25): 1) существует 4 точки пересечения прямой и окружностей – A_1, A_2, B_1, B_2 ; 2) существует 3 точки пересечения прямой и окружностей – A_1, A_2 и B_1 (точка B_1 касается окружности 2); 3) существует 2 точки пересечения прямой и окружностей – A_1 и B_1 . Случаи 2 и 3

фактически определяют пределы интегрирования. Для случая 1) комбинация точек A_1 и B_1 включается в интеграл (24), если из 4-х расстояний, а именно $|A_1B_1|$, $|A_1B_2|$, $|A_2B_1|$, $|A_2B_2|$, расстояние $|A_1B_1|$ является минимальным. В этом случае элементарная площадка на поверхности окружности 1 находится в зоне видимости с элементарной площадкой на окружности 2.

В гетерогенной среде, состоящей из большого числа частиц, проблема вычисления угловых коэффициентов для пары частиц усложняется их возможным частичным либо полным экранированием другими частицами. Алгоритм вычисления угловых коэффициентов в этом случае проиллюстрирован на рисунке 3. Система (25) для каждой комбинации точек A_1 и B_1 должна дополниться аналогичными уравнениями для каждой из частиц всей гетерогенной системы. Отрезок A_1B_1 не экранирован другими частицами системы, если у систем вида (25) отсутствуют решения. При этом важно отметить, что возможны кардинально различные ситуации, проиллюстрированные на рисунке 3. Если точки C_1, C_2 , являющиеся решением системы уравнений вида (24), расположены между точками A_1 и B_1 , то соответствующая частица 3 экранирует точки A_1 и B_1 друг от друга (условие экранировки при существовании решения: $A_1C_1 \cdot B_1C_2 < 0$ (скалярное произведение векторов меньше нуля)). Если же точки пересечения прямой A_1B_1 и какой-либо окружности существуют (например, окружность 4 на рисунке 3), но скалярное произведение $A_1D_1 \cdot B_1D_2 > 0$, то соответствующая частица не экранирует точки A_1 и B_1 друг от друга. Выполнение описанных условий при численном интегрировании позволяет сравнительно просто алгоритмически находить угловые коэффициенты в системе, состоящей из большого числа частиц.

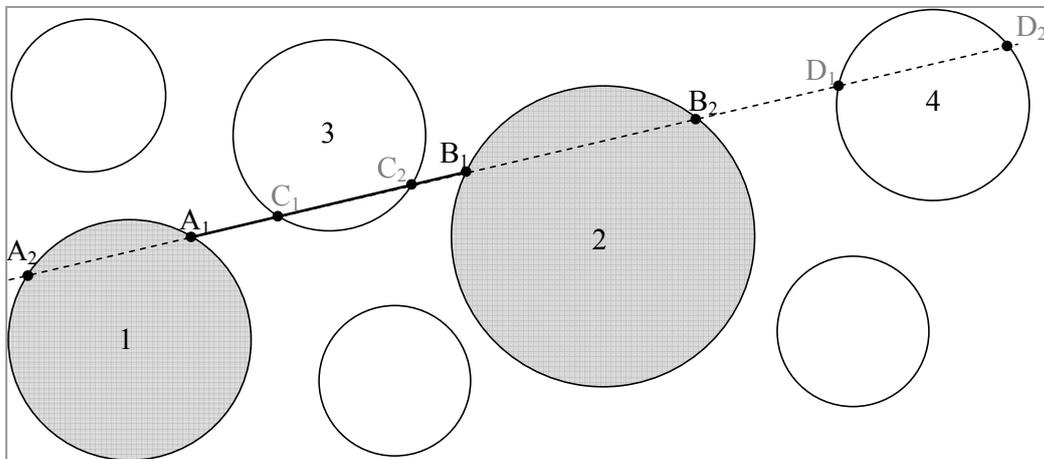


Рисунок 3. К проблеме вычисления угловых коэффициентов для двух сферических частиц в гетерогенной среде.

Перейдем далее к алгоритму описания процесса радиационного теплопереноса в гетерогенной системе на основе случайных блужданий ансамбля броуновских частиц.

Алгоритм численного моделирования процесса комбинированного теплопереноса в гетерогенной среде. На основе изложенных выше теоретических построений может быть кратко сформулирован алгоритм расчета задачи теплопереноса в гетерогенной среде. Он состоит из следующих пунктов.

- 1) Генерация гетерогенной микроструктуры на основе численного решения системы уравнений (2) для полидисперсной либо монодисперсной совокупности частиц, которые в начальном состоянии случайно разбросаны по расчетной области.
- 2) Расчет угловых коэффициентов гетерогенной системы частиц.

- 3) Настройка параметров численной схемы: выбор масштабов энергии БЧ (уравнение (9)), шага по времени, задание начальных и граничных условий для поля концентраций БЧ.
- 4) Определение вероятностей перехода БЧ на соседние элементы для всех структурных элементов системы согласно соотношениям (19), (21), (22). Вероятности определяются по состоянию системы на предыдущем временном шаге.
- 5) Определение числа частиц, которые должны остаться на старом структурном элементе в течение данного шага по времени (вероятность p_0). В розыгрыше переходов на структурные элементы участвует только $N(1 - p_0)$ частиц.
- 6) Цикл по всем структурным элементам. Для каждого элемента цикл по БЧ, которые должны перескакивать на соседние элементы.
- 7) Для каждой БЧ разыгрывается, каким именно механизмом (радиационным или кондуктивным) она переносится. Это определяется соотношением вероятностей $p_-^{(cd)}$ и $p_-^{(rd)}$.
- 8) Если перенос осуществляется кондуктивным механизмом, то он разыгрывается на основе соответствующих вероятностей, определенных в п.4., событие: какому именно из кондуктивных соседей передается БЧ. После определения такого соседа концентрация БЧ на нем увеличивается на 1, а на рассматриваемом элементе – уменьшается на 1.
- 9) Если передача БЧ осуществляется радиационным механизмом, то розыгрыш переноса осуществляется в несколько этапов:
 - 9.1) В соответствии с вероятностями радиационного переноса случайно выбирается один из «радиационных» соседей (пусть его номер i в общем массиве), в направлении которого передается частица.
 - 9.2) Разыгрывается событие: БЧ поглощается на i -ом структурном элементе, либо она рассеивается (отражается). Вероятность поглощения БЧ равна ε , где ε – степень черноты поверхности структурного элемента. Если БЧ поглощается, то концентрации БЧ на обменивающихся структурных элементах изменяются на 1, как и в п.8.
 - 9.3) Если частица рассеивается, то возвращаемся к п.9.1, но розыгрыш с передачей БЧ уже ведется не с исходным, а с i -м структурным элементом. Цикл повторяется до тех пор, пока БЧ не поглотится на каком-либо структурном элементе.
- 10) Генерация тепла на структурных элементах. Концентрация БЧ увеличивается пропорционально $\phi_i \Delta t$ (уравнение (22)).
- 11) Определение новых концентраций БЧ и, соответственно, температур на всех элементах. Переход к п. 4, если суммарное время расчета не превысило заданное. Если суммарное время расчета равно заданному, то текущее поле концентраций БЧ на структурных элементах определяет искомое поле температур.
- 12) Генерируется достаточно большое количество образцов и для них выполняются п.п.1-11 для получения статистически достоверных результатов.

Тестирование модели кондуктивного теплопереноса. Описанный алгоритм был реализован в виде компьютерной программы, которая позволяет одновременно генерировать гетерогенную структуру с заданными параметрами и выполнять расчет теплопереноса для такой системы [19].

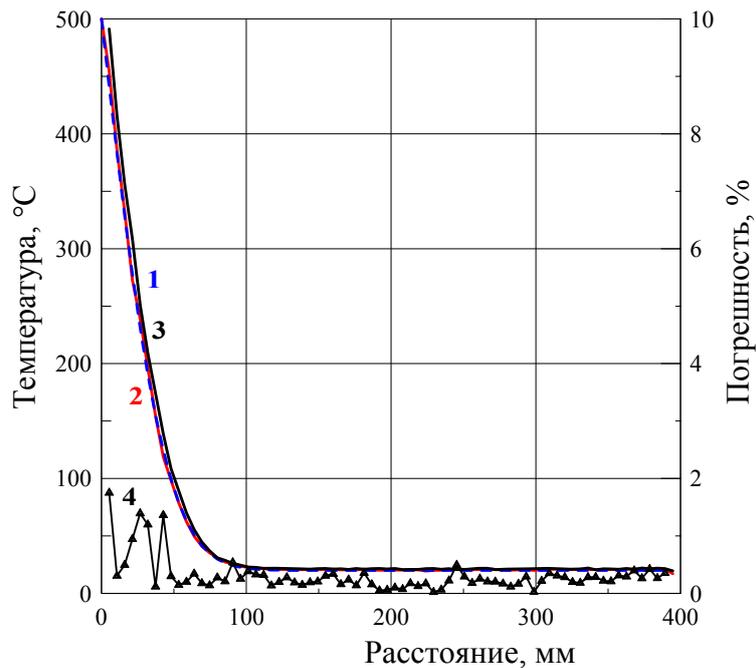


Рисунок 4. Сравнение профиля температуры по длине образца для задачи нагрева прямоугольной области размером 400×400 мм с начальной температурой 20 °С и температурой на левой границе 500 °С. Время нагрева 30 мин. 1 – аналитическое решение [16] для $\lambda_{ef}=0.8$ Вт/(м К); 2, 3 – решение с использованием изложенного в работе метода случайных блужданий ансамбля броуновских частиц, усредненное по поперечным сечениям системы. 2 – монодисперсная система, состоящая из частиц радиусом 2 мм и степенью заполнения пространства 82%; 3 – полидисперсная система со средним радиусом частиц 2 мм и той же степенью заполнения пространства. 4 – погрешность расчета, % (правая ось абсцисс).

На рисунке 4 представлено сопоставление результатов расчета прогрева прямоугольной области размером 400×400 мм с начальной температурой 20 °С и температурой на левой границе 500 °С. Рассмотрен случай, когда работает только кондуктивный механизм теплопереноса. Сравнивались точное аналитическое одномерное решение [16] с решениями, полученными предложенным в работе методом. Отметим, что теплопроводность частиц полагалась равной $\lambda_s = 10$ Вт/(м К), а коэффициент пропорциональности в (14) для площади контакта частиц $k_s = 0.01$. Оказалось, что решение для монодисперсной системы (радиус частиц 2 мм, степень заполнения пространства 82%) хорошо совпадает с аналитическим, если эффективная теплопроводность в последнем случае выбирается равной $\lambda_{ef} \approx 0.8$ Вт/(м К). Для полидисперсной системы (радиусы частиц равномерно разбросаны в интервале от 1.5 до 2.5 мм, степень заполнения пространства 82%) эффективная теплопроводность оказалась несколько выше - $\lambda_{ef} \approx 0.95$ Вт/(м К). Эти результаты качественно согласуются с известными данными по эффективной теплопроводности гетерогенных материалов.

Тестирование модели радиационного теплопереноса. Отдельно выполнялось тестирование алгоритма для случая радиационного теплопереноса в гетерогенной системе. Цель данной части работы состоит в тестировании модели и алгоритма, описывающих радиационный теплоперенос в гетерогенной среде. В качестве базового

примера для сравнения была выбрана задача о радиационном теплопереносе в одномерной среде, на границах которой поддерживается заданная температура, а теплопроводность определяется радиационной компонентой теплопроводности пористого каркаса в приближении плотного оптического слоя (пористость θ) монодисперсных частиц радиуса r_p [20].

$$\lambda_{rad} = \frac{32}{9} \frac{\theta^2}{1-\theta} r_p \sigma_0 T^3, \quad (26)$$

Задача формулируется следующим образом:

$$\rho_0 c_p (1-\theta) \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda_{rad}(T) \frac{\partial T}{\partial x} \right), \quad (27)$$

Граничные и начальные условия

$$T|_{x=0} = T_{lf}, \quad T|_{x=L} = T_{rt}, \quad T|_{t=0} = T_0. \quad (28)$$

Задача (26)-(28) решалась численно методом прогонки для условий $T_{lf} = 1000$ °C, $T_{rt} = 20$ °C, $T_0 = 20$ °C.

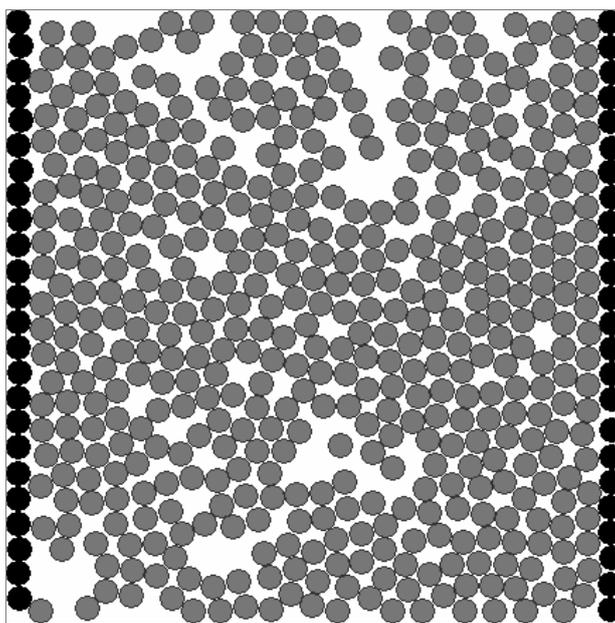


Рисунок 5. Пример монодисперсной структуры, использовавшейся при тестировании модели. Ряды частиц на левой и правой границах, изображенные черным цветом, использовались для задания граничных условий.

Для того, чтобы в гетерогенной системе смоделировать граничные условия (28), на левой и правой границах системы генерировался ряд частиц, плотно примыкающих друг к другу (они изображены черным цветом на рисунке 5). Для этих двух рядов задавались и поддерживались граничные условия (28).

Результаты вероятностного моделирования и решения одномерной задачи сопоставлены на рисунке 6. Как можно видеть, предложенная новая методика дает удовлетворительную точность расчетов. Однако для получения достоверных

результатов эта модель требует дополнительной проверки на других тестовых задачах, а также сопоставления с экспериментальными данными.

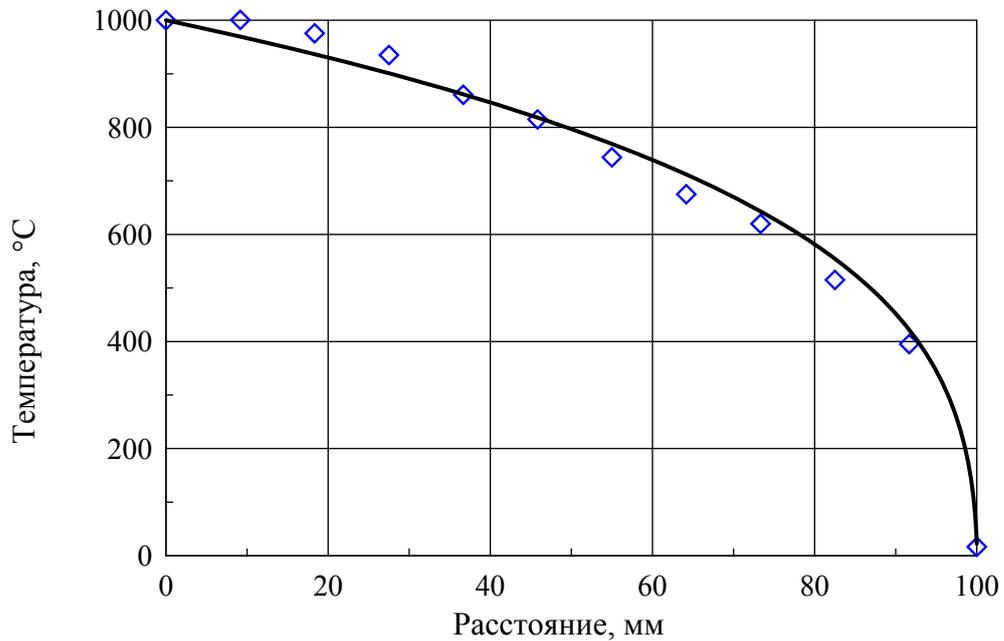


Рисунок 6. Сравнение профиля температуры по длине образца для задачи радиационного теплопереноса и нагрева гетерогенной системы размером 100×100 мм с начальной температурой 20 °C и температурой на левой границе 1000 °C. Время нагрева 300 секунд, пористость системы 40%, степень черноты частиц $\varepsilon = 0.9$, радиус частиц 5 мм. Сплошная линия – численное решение одномерной задачи (26)-(28), маркеры – результаты вероятностного моделирования на основе предложенной в работе модели и методики (усреднение вертикальным направлениям и по 5 образцам гетерогенной структуры).

В заключении работы приведем результаты по моделированию нагрева двумерной гетерогенной системы при наличии в одной или нескольких частицах системы источника тепла. Рассматривалась прямоугольная область размером 100×100 мм с адиабатическими границами. Результаты моделирования приведены на рис. 7-9.

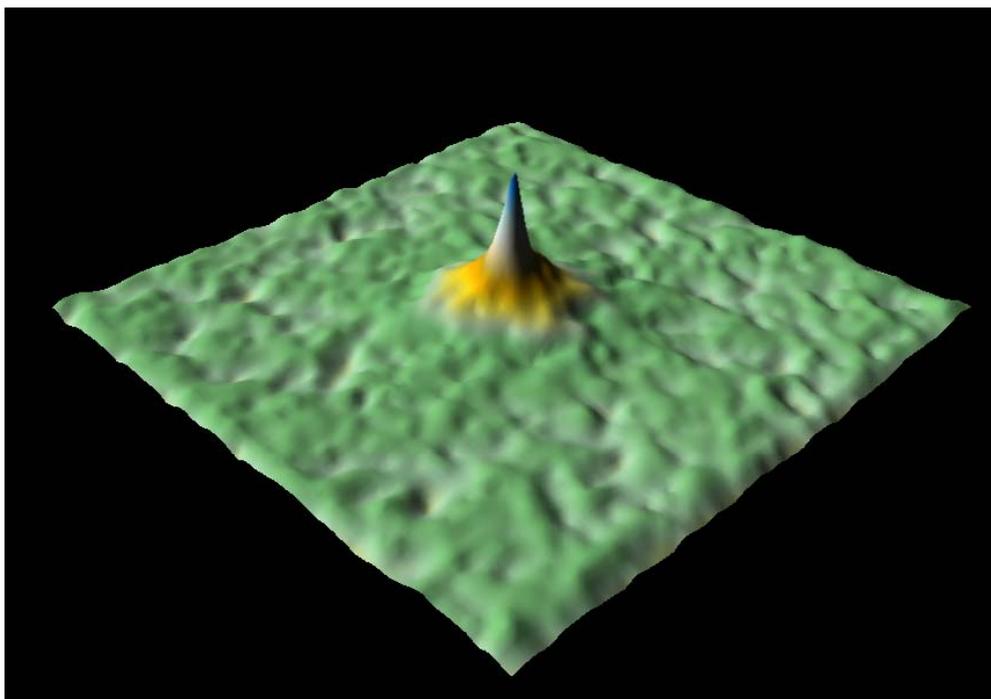


Рисунок 7. Температурное поле в гетерогенной монодисперсной среде для случая, когда в одной из частиц существует постоянный источник тепла (плотность 10^8 Дж/м³). Начальная температура 20 °С. Прогрев в течение 10 секунд. Диаметр частиц 1 мм. Степень заполнения пространства 80 %. Максимальная температура нагретшейся частицы 120 °С.

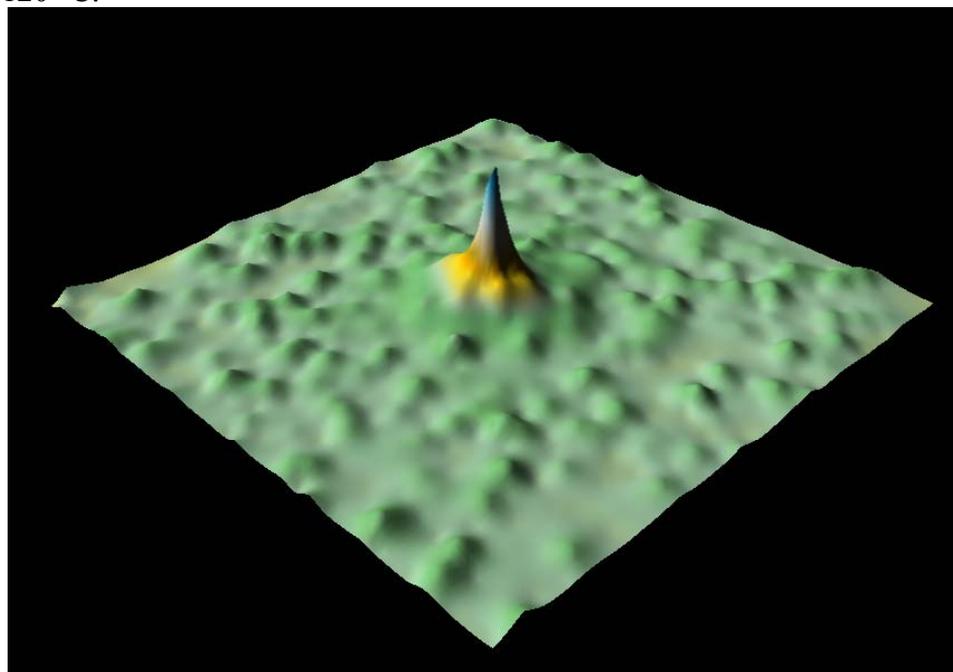


Рисунок 8. Температурное поле в гетерогенной полидисперсной среде (плотность источника в одном структурном элементе 10^8 Дж/м³). Начальная температура 20 °С. Прогрев в течение 10 секунд. Диаметр частиц равномерно распределен в интервале 0.5-2 мм. Степень заполнения пространства 80 %. Максимальная температура нагретшейся частицы 110 °С.

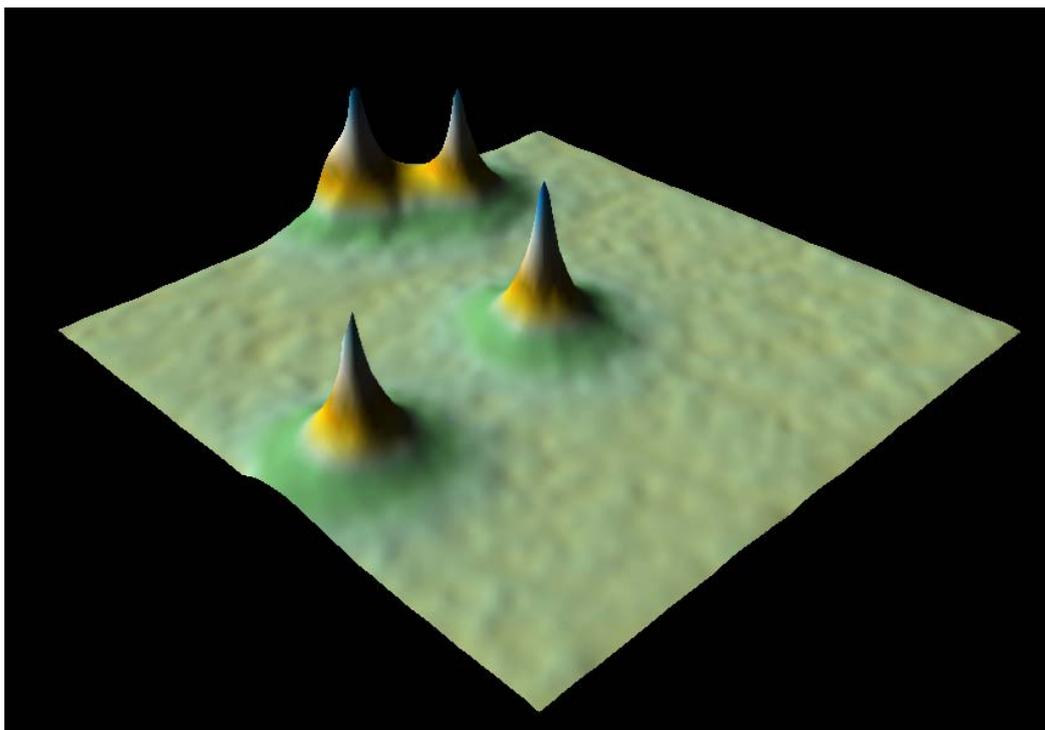


Рисунок 9. Температурное поле в гетерогенной монодисперсной среде для случая, когда в четырех произвольных частицах существует постоянный источник тепла (плотность $5 \cdot 10^8$ Дж/м³). Начальная температура 20 °С. Прогрев в течение 5 секунд. Диаметр частиц 1 мм. Степень заполнения пространства 80 %. Максимальная температура нагретшейся частицы 465 °С.

Заключение. Таким образом, в работе предложен метод описания процессов комбинированного, радиационного и кондуктивного, теплопереноса, отличительной особенностью которого является детальный учет микроструктуры гетерогенной среды, возможность описания ее полидисперсности и многокомпонентности на микроуровне. Подход основан на методе случайных блужданий ансамбля броуновских частиц – носителей энергии. Это позволяет моделировать нестационарное поле температур в гетерогенной стохастической среде с учетом зависимости свойств среды от температуры.

Предложенный подход представляется перспективным с точки зрения его дальнейшего обобщения для случая комбинированного тепло- и массопереноса в многокомпонентных средах, наличия экзотермических химических реакций (например, горение) и т. д. В перспективе комбинация используемых в работе метода генерации структуры и метода описания теплопереноса может быть применена для описания теплопереноса в движущейся гранулярной среде, лежащего в основе ряда технологических процессов, например технологии кипящего слоя.

Список использованных источников

- [1] Федотов С.П., Третьяков М.В. Стационарные режимы гетерогенной химической реакции при наличии внешних шумов. Хим.физика. 1988. Т.7, № 11. с. 1533-1537.
- [2] Третьяков М.В., Федотов С.П. Стационарные режимы гетерогенной реакции при наличии белого пуассоновского шума. Хим.физика. 1990. Т.9, № 2. с. 252-257.
- [3] Федотов С.П., Третьяков М.В. О стохастическом воспламенении частицы. Хим.физика. 1991. Т.10, № 2. с. 238-241.
- [4] Masoliver J., West B.J., Lindenberg K. Bistability driven by Gaussian colored noise: First-passage times. Phys. Rev. A. 1987. Vol. 35. pp. 3086 – 3094.
- [5] Шкилев В.П. Модель аномального стохастического переноса. ЖЭТФ. 2005. Т. 128, №3. с. 655-661.
- [6] Павлов А.Н., Павлова О.Н. Анализ корреляционных свойств случайных процессов по сигналам малой длительности. Писма в ЖТФ. 2008. Т. 34, №7. с. 71-77.
- [7] Павлов А.Н., Анищенко В.С.. Мультифрактальный анализ сложных сигналов. УФН. 2007. Т.177, № 8. с.859.
- [8] Klahr C. N. (1960) A Monte Carlo Method for the Solution of Elliptic Partial Differential Equation. Mathematical Methods for Digital Computers, A. Ralston and H. S. Wilf, eds., John Wiley and Sons. New York. pp. 157–164.
- [9] Emery, A. F., and Carson, W. W.. A Modification to the Monte Carlo Method—The Exodus Method. ASME J. Heat Transfer, 1968. Vol. 90. pp. 328–332.
- [10] Haji-Sheikh A., and Sparrow E. M. The Solution of Heat Conduction Problems by Probability Methods. ASME J. Heat Transfer, 1967. Vol. 89. pp. 121–130.
- [11]. Соболев И.М. (1973) Численные методы Монте-Карло. Наука, Москва.
- [12] Grigoriu M. A Monte Carlo Solution of Heat Conduction and Poisson Equations. J. of Heat Transfer. 2000. Vol. 122. pp. 40-45.
- [13] Naraghi M. H. N., Chung B. T. F. A multiple step random walk Monte Carlo method for heat conduction involving distributed heat sources. American Institute of Aeronautics and Astronautics and American Society of Mechanical Engineers, Joint Thermophysics, Fluids, Plasma and Heat Transfer Conference, 3rd, St. Louis, MO, June 7-11, 1982, ASME.
- [14] Emmanuel S., Berkowitz B. Continuous time random walks and heat transfer in porous media. Transp Porous Med. 2007. Vol. 67. pp. 413–430.
- [15] Рашковский С.А. Структура гетерогенных конденсированных смесей. Физика горения и взрыва, 1999, Т.35, №5. с.65-74.
- [16] Лыков А. В. (1967) Теория теплопроводности. Высшая школа, Москва.
- [17] Зигель Р., Хауэлл Дж. (1975) Теплообмен излучением. Мир, Москва.
- [18] Блох А. Г. (1991) Теплообмен излучением: справочник. Москва.
- [19] Гринчук П.С., Рабинович О.С., Мосолова Е.Г. Моделирование комбинированного теплопереноса в гетерогенной среде на основе случайных блужданий ансамбля броуновских частиц. Теплоперенос-2007. Сборник научных трудов ГНУ ИТМО им. А.В. Лыкова. 2007. с. 435-351.
- [20] Павлюкевич Н. В. (2003) Введение в теорию тепло- и массопереноса в пористых средах. Минск.